

УДК 530.145

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ КВАНТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ, ПРЕДСТАВЛЕННЫХ ИНТЕГРАЛАМИ ПО ПУТЯМ

Дегтярева Я. В., Бирюков А. А.

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С. П. Королёва, г. Самара

В настоящее время активно изучаются нелинейные процессы взаимодействия микросистем с лазерным излучением различной конфигурации и различной степени интенсивности (возбуждение и диссоциация молекул, ионизация атомов под действием лазерного излучения и др.). Представляется актуальным исследовать вероятности переходов в многоуровневых квантовых системах вне рамок теории возмущений и приближений, которые накладывают ограничения на структуру лазерного излучения – как по интенсивности, так и по форме импульсов. С этой целью развивается теория представления вероятностей квантовых переходов интегралами по траекториям от действительного знакопеременного функционала.

В работах [1-2] доказано, что вероятность квантового перехода $P(n_f, t_f | n, 0)$ из состояния $|n\rangle$ в момент времени $t = 0$ и состояние $|n_f\rangle$ в момент времени t_f может быть представлена в виде функционального интеграла с действительным подынтегральным функционалом:

$$P(n_f, t_f | n, 0) = A_{norm} \sum_{n_1 \dots n_K} \sum_{m_1 \dots m_K} \int_0^1 \dots \int_0^1 \times \\ \times \cos(S[n_f, n_K, \xi_K, m_K, \zeta_K; \dots; n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; \dots; n, \xi_0, \zeta_0]) d\xi_0 \dots d\xi_K d\zeta_0 \dots d\zeta_K, \quad (1)$$

где $S[n_f, n_K, \xi_K, m_K, \zeta_K; \dots; n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; \dots; n, \xi_0, \zeta_0]$ – действие для изучаемого перехода в энергетическом представлении, n_i, m_i – квантовые числа, характеризующие состояние системы, A_{norm} – константа, сохраняющая нормировочное условие $\sum_{n_f} P(n_f, t_f | n, 0) = 1$. Действие S в выражении (1) конкретизируется для каждой конкретной исследуемой квантовой системы и специфики ее взаимодействия с заданным электромагнитным полем. На практике численное вычисление вероятностей по данному методу сопряжено с рядом трудностей из-за большой размерности входящих в выражение интегралов. В работе предлагается метод, позволяющий вычислять вероятности квантовых переходов по формуле (1) за любой интервал времени.

Программа численного вычисления интеграла (1) базируется на рекуррентных соотношениях для вспомогательных функций вероятностей $\tilde{P}_{cos}, \tilde{P}_{sin}$:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{cos}(n_k, m_k, t_k; n, 0) \\ = R_{k-1}^{\wedge} \cos(\Delta S[n_k, \xi_k, m_k, \zeta_k; n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}]) \tilde{P}_{cos}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n, 0) \\ - R_{k-1}^{\wedge} \sin(\Delta S[n_k, \xi_k, m_k, \zeta_k; n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}]) \tilde{P}_{sin}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n, 0) \\ \text{и} \\ \tilde{P}_{sin}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n, 0) \\ = R_{k-2}^{\wedge} \sin(\Delta S[n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; n_{k-2}, \xi_{k-2}, m_{k-2}, \zeta_{k-2}]) \tilde{P}_{cos}(n_{k-2}, m_{k-2}, t_{k-2}; n, 0) \\ + R_{k-2}^{\wedge} \cos(\Delta S[n_{k-1}, \xi_{k-1}, m_{k-1}, \zeta_{k-1}; n_{k-2}, \xi_{k-2}, m_{k-2}, \zeta_{k-2}]) \tilde{P}_{sin}(n_{k-2}, m_{k-2}, t_{k-2}; n, 0), \end{aligned}$$

где через \hat{R}_k обозначены операторы

$$\hat{R}_k = \sum_{n_k=1}^N \sum_{m_k=1}^N \int_0^1 d\xi_k \int_0^1 d\zeta_k.$$

Функции $P_{cos}(n_k, m_k, t_k; n, 0)$ при $n_k = m_k$ являются вероятностями квантового перехода из состояния $|n\rangle$ в момент времени $t = 0$ и состояние $|n_k\rangle$ в момент времени $t_k > 0$, то есть

$$P(n_k, t_k | n, 0) = P_{cos}(n_k, m_k, t_k; n, 0) \delta_{n_k m_k}.$$

В рамках предложенного метода успешно описываются эксперименты по возбуждению атомов, молекул электромагнитными полями высокой интенсивности со сложной пространственно-временной структурой. Полученные результаты показали, что выбранный метод численного моделирования дает результаты, позволяющие описать нелинейные процессы в атомной физике с высокой точностью. Достоинством предложенного метода является его малая ресурсоемкость.

Библиографический список

1. Ryazanov G.V. Quantum-mechanical probability as a sum over path // ЖЭТФ. – 1958. – V.35, no.1.
2. Бирюков, А. А. Вычисление вероятностей переходов квантовой системы путем интегрирования вещественных функционалов / А. А. Бирюков, М. А.Шлеенков // Теоретическая физика. – 2012. – Т.13. – С. 8-42.
3. Бирюков, А. А. Представление вероятностей квантовых переходов функциональным интегралом в пространстве энергетических состояний / А. А. Бирюков, М. А.Шлеенков // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. – 2015. – Т.19, №2. – С. 221-240.